



T1170

**ESTUDO DO ARMAZENAMENTO DE H<sub>2</sub> COMBUSTÍVEL EM ZEÓLITAS ATRAVÉS DE DINÂMICA MOLECULAR**

Diego Pereira de Oliveira (Bolsista PIBIC/CNPq) e Prof. Dr. Charlles Rubber de A. Abreu (Orientador), Faculdade de Engenharia Química - FEQ, UNICAMP

Neste trabalho, foi avaliado o potencial de aplicação de zeólitas, que são cristais microporosos de aluminossilicatos, no armazenamento de hidrogênio através de processos adsorptivos. O estudo foi efetuado por simulação molecular, avaliando o comportamento de todo o sistema adsorptivo, composto da zeólita, cátions de compensação e moléculas de hidrogênio adsorvidas. Utilizando o software de simulação LAMMPS, de código aberto e distribuição livre, foi desenvolvido, baseado na teoria da Dinâmica Molecular, um modelo capaz de computar grandezas termodinâmicas do sistema através de integrações canônicas em diversas temperaturas. A modelagem permitiu comparar o comportamento de zeólitas com diferentes graus de acidez, além de verificar efeitos decorrentes da mobilidade dos cátions e interações eletrostáticas. O modelo proposto mostrou-se válido para avaliar os calores de adsorção do hidrogênio, através das energias potenciais médias da molécula adsorvida, gerando subsídios para estudos posteriores de maior complexidade. Para assegurar a confiabilidade dos resultados obtidos, foi efetuada a análise estatística por médias em blocos, evitando erros intrínsecos referentes a dados correlacionados no cálculo das energias potenciais médias.

Zeólita - Adsorção - Dinâmica molecular